

## 4.4.1 Merkpunkte Kapitel 4

Auch die Elektronen(wellen) des Kristall werden gebeugt; es gilt die Bragg-Bedingung:

- Die Bragg-Bedingung ist für alle Zustände ( $= \mathbf{k}_B$ ; *nicht mit Boltzmannkonstant  $k_B$  verwechseln!*) erfüllt, die auf den Rändern einer **Brillouinzone** liegen
- Brillouinzonen sind die ineinandergeschachtelten Polyeder im reziproken Gitter, die man mit der "Mittelhalbierenden" Konstruktion erhält.
- Die **1. BZ** ist die **Wigner-Seitz EZ** des reziproken Gitters.

$$\mathbf{k} - \mathbf{K} = \mathbf{G}$$

Die Untermenge der gebeugten Elektronenwellen überlagern sich zu stehenden Wellen; es gibt grundsätzlich **zwei** Möglichkeiten:

- Die Maxima der **stehende Wellen** liegen bei oder zwischen den Gitterpunkten/Atomen ( $\mathbf{a} =$  Gitterkonstante).
- Die zugehörigen Energien **müssen** verschieden sein; wir erhalten auf den Rändern der Brillouinzonen eine Energieaufspaltung der  $E(\mathbf{k})$ -Parabel.

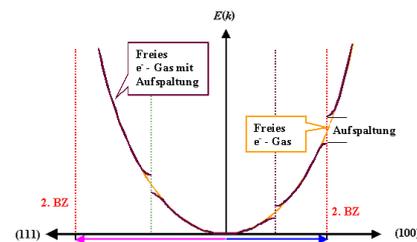
$$\psi^\pm = \exp(i\mathbf{k}_B r) \pm \exp(-i\mathbf{k}_B r)$$

$$\psi^+_{\max} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{a} \quad \mathbf{n} = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\psi^-_{\max} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{a} + \mathbf{a}/2 \quad \mathbf{n} = 0, 1, 2, 3, \dots$$

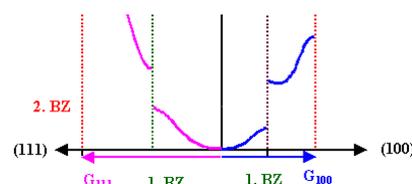
Das kann nur so aussehen:

- Nur in der Nähe einer **BZ** ist die freie Elektronengas Dispersionskurve "verbogen"; direkt auf der **BZ** macht sie einen Sprung, d.h. erlaubt **zwei** Energiewerte für ein  $\mathbf{k}$ .
- Qualitativ bleibt in dieser Betrachtung nur die Größe der Aufspaltung und der Verlauf in der Nähe der **BZ**.



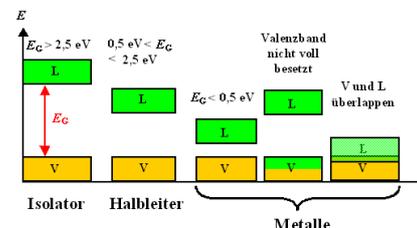
Reale **Dispersionskurven** können auch zwischen **BZ** von der idealen "freien Elektronengasparabel" abweichen

- Insbesondere müssen die Maxima und Minima **nicht** immer auf der **BZ** liegen.
- Die Größe der Energieaufspaltung ist ein Materialparameter



Ein Banddiagramm ist die stark vereinfachte Pauschaldarstellung der erlaubten Energien.

- Nur **Valenzband** (letztes mit Elektronen teil- oder vollbesetztes Band) und das darüberliegende **Leitungsband** sind wichtig
- Ein Band hat genau so viele Zustände wie die Zahl der **EZ** im Kristall
- Die Bandstruktur ist ein "Materialparameter"; wichtig ist die Größe der Energielücke  $E_G$ .



Allein die Größe der Energielücke entscheidet darüber, ob ein (perfekter) Kristall ein Leiter (= Metall; Halbmetall), Halbleiter oder Isolator ist.

Bei Band-Band Übergängen gelten Energie- und (Kristall)impulserhaltungssatz

- Energiezufuhr: Thermisch oder Photonen; Energieabgabe: Thermisch oder Photonen
- Kristallimpulserhaltungssatz: Auf inelastische Stöße verallgemeinerte Braggbedingung. Verhindert Großteil der energetisch erlaubten Übergänge.

$$e^-(V) + E \Rightarrow e^-(L) + h^+(V)$$

$$E \geq E_G$$

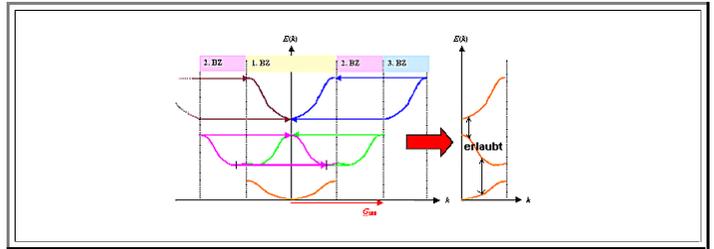
$$\underline{k} - \underline{k}' = \underline{G}$$

$$|\underline{k}| \neq |\underline{k}'|$$

**$\underline{G}$  = reziproker Gittervektor**

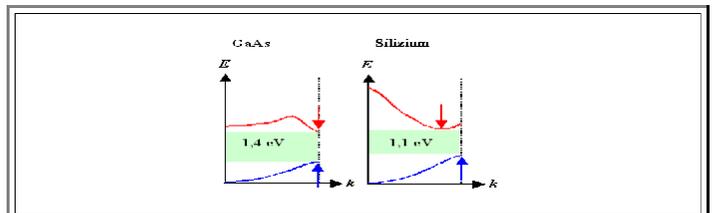
Reduzierte Banddarstellung: Zeichentechnischer "Trick" erlaubt einfachste Darstellung der möglichen Übergänge.

- Nur Übergänge senkrecht nach oben (= Generation) oder nach unten (= Rekombination) sind erlaubt.



Direkte und indirekte Halbleiter: Rekombination (nach Thermalisierung) einfach beziehungsweise "unmöglich" (= schwer).

- Direkte Halbleiter (**GaAs**, **GaAlAs**, **InP**, **GaN**, ...) sind Materialien der **Optoelektronik/** Photonik.
- Direkte Halbleiter (**Si**, **Ge**, ..) sind Materialien der Mikro**elektronik**



**Direkte Halbleiter:**  
Lichtemission bei Rekombination  
**Indirekte Halbleiter:**  
Strahlungslose Rekombination  
(über Defekte)

**Lebensdauer**  $\tau$ : Zeit zwischen Generation und Rekombination.

- Diffusionslänge  $L = (D\tau)^{1/2}$ : Im Mittel zurückgelegte Strecke
- $\tau$  und  $L$  sind sehr wichtige Materialparameter.

**Direkte Halbleiter:**  $\tau$ ;  $L$  klein: ns bzw. nm.  
**Indirekte Halbleiter:**  $\tau$ ;  $L$  groß; stark defektabhängig; bis zu s bzw. mm.

**Fragebogen**  
Multiple Choice Fragen zu Kapitel 4